

ОДНОЕЛЕКТРОННІ СТАНИ ОСЦИЛЯТОРНО-КУЛОНІВСЬКОЇ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

Г. В. Понеділок, М. І. Клапчук

*Національний університет "Львівська політехніка"
Інститут прикладної математики та фундаментальних наук,
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна*

(Отримано 20 березня 2012 р.; в остаточному вигляді — 11 вересня 2012 р.)

Досліджено стаціонарні одноелектронні стани квантової точки, яка моделюється сферично-симетричним осциляторно-кулонівським потенціалом. Ця модель узагальнює відому параболічну модель квантової точки. Отримано трансцендентне рівняння для спектра електронів, вирази для відповідних власних функцій. Вивчено залежність спектра одноелектронної задачі від ефективного розміру квантової точки та інших параметрів модельного потенціалу. Ці параметри можуть слугувати головними параметрами для оптимізації енергетичної структури сферичної квантової точки з метою отримання реальних структур із наперед заданими фізико-хімічними властивостями. Визначено умови застосовності моделі до опису електронних властивостей металевих та напівпровідникових квантових точок. Отримані результати зіставлено з результатами досліджень інших моделей квантової точки — сферичною, прямокутною та параболічною.

Ключові слова: квантова точка, штучний атом.

PACS number(s): 73.22.-f, 73.21.La, 73.22.Dj

I. ВСТУП

Останнім часом у зв'язку з бурхливим розвитком технологічних можливостей створення різних наносистем зростає інтерес до всестороннього дослідження їхніх властивостей [1]. Квантові точки (КТ) є основними компонентами наноелектроніки [2]. Вони мають багато атомоподібних властивостей, наприклад такі, як специфічна структура орбіталей. Тому їх називають ще штучними атомами (ША). Особливу увагу приділяють розрахунку дискретних енергетичних станів у квантових ямах.

Теоретично вивчали стаціонарні стани електронів у квантовій ямі в багатьох роботах, де запропоновано модельний потенціал або у вигляді нескінченно глибокої потенціальної ями [3], або параболічний потенціал [4]. Проте для реальних квантових ям завдяки їхнім скінченним нанорозмірам у тривимірному просторі модельний потенціал повинен бути скінченної глибини V_0 і радіуса R [5].

Віднедавна можна говорити про новий клас сферично-симетричних ША [6] які моделюються рівномірно позитивно зарядженою нанокуюлею радіуса R з розміщеними у ній електронами. Зокрема заслуговує уваги праця [7], де запропонували модель штучного рідбергівського атома (ШРА). У межах цієї моделі показано, як спектр і розподіл електронної густини залежать від радіуса нанокуюлі, проведено глибоку аналогію з атомом Рідберга [8].

У нашій статті запропоновано нову узагальнену модель ША. Приймаємо, що всередині нанокуюлі є томсонівський осциляторний потенціал, а на великих віддальх потенціал має кулонівський характер. Такий потенціал, уперше ввів З. Флюгге, пізніше він був успішно застосований для опису енергетичних рівнів мезоатомів [10], де враховано скінченний об'єм їхнього яд-

ра. Знаходження власних функцій та власних значень енергії електрона з комбінованим потенціалом навіть такого простого виду є важкою задачею. Вплив розміру й форми ША особливо сильно позначається на розташуванні енергетичних рівнів атомів із великим значенням Z . При цьому вплив розмірів штучного атома стає настільки вагомим, що енергія s -рівня стає в кілька разів меншою, ніж для точкового ША.

У запропонованій моделі прийнято, що заряд рівномірно розподілений по скінченному об'єму радіуса R , тому електронні рівні зсуваються вгору (послаблення взаємодії) порівняно з очікуваними значеннями для точкового ША. Покажемо, що врахування розмірів нанокуюлі є найвагомим для s -рівнів і менше впливає на p -рівні.

У розділі II описано узагальнену модель ША, отримано трансцендентне рівняння для визначення енергетичних рівнів електрона та вираз для радіальної хвильової функції системи. У розділі III проаналізовано отримані рівняння, а в розділі IV граничні випадки одержаних співвідношень. У розділі V проведено чисельні розрахунки електронних енергетичних рівнів, електронної функції розподілу для різних значень радіуса R і різних значень орбітального квантового числа.

II. МОДЕЛЬ СФЕРИЧНОЇ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

Розглянуто електрон у полі сферично-симетричного потенціалу:

$$V_0(r) = \begin{cases} \frac{Z e^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2), & r \leq R \\ -\frac{\alpha}{r}, & r \geq R, \end{cases} \quad (1)$$

де у границі $\lim_{r \rightarrow 0} V_0(r) = -\frac{3Ze^2}{2R} = -V_0$. Тут $V_0, \alpha > 0$ — додатні константи. Для нанокупі, що має радіус R і позитивний заряд $Z|e|$, $\alpha = Ze^2$ з умовою, що електростатичний потенціал $V(r)$ є неперервним при $r = R$. Для спрощення в (1) не враховано впливу середовища, тобто діелектрична проникність дорівнює одиниці.

Радіальне рівняння Шредингера в полі потенціалу (1) матиме вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\Phi(r)) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \Phi(r) + V_0(r)\Phi(r) = E\Phi(r). \quad (2)$$

Оскільки розв'язати це рівняння точно неможливо, тому застосуємо наближений метод, при якому вимагається умова неперервності хвильових функцій та їхніх перших похідних на границі $r = R$:

$$\Phi^<(R) = \Phi^>(R); \quad \Phi^<'(R) = \Phi^>'(R). \quad (3)$$

Цей наближений розв'язок широко застосовують для різних задач із границею розділу наносистеми [11–13].

Область $r \leq R$.

Знерозмірене рівняння Шредингера в цій області

$$\frac{d^2\Phi^<(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\Phi^<(\rho)}{d\rho} + \left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \rho^2 + 3\left(\frac{R}{r_0}\right)^2 + \epsilon \right) \Phi^<(\rho) = 0, \quad (4)$$

де введено позначення для характерної довжини ρ та енергії ϵ :

$$\rho = \frac{r}{r_0}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}},$$

$$\epsilon = \frac{E}{E_0}, \quad E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}, \quad \omega_0^2 = \frac{Ze^2}{mR^3}.$$

Розв'язок шукатимемо у вигляді

$$\Phi^<(\rho) = \rho^l \exp\left(-\frac{1}{2}\rho^2\right) \omega(\rho),$$

де невідома функція $\omega(\rho)$ задовольняє рівняння

$$\omega''(\rho) + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - \rho\right) \omega'(\rho) + \left[\epsilon - 2\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right) \right] \omega(\rho) = 0.$$

Після заміни змінної $\rho^2 = x$ отримаємо рівняння Куммера [9] і розв'язок (4) запишемо через вироджену гіпергеометричну функцію $M(a, b, x)$

$$\Phi^<(\rho) = A_l \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} M \times \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \rho^2 \right), \quad (5)$$

тут A_l — константа.

Область $r \geq R$.

Радіальне рівняння Шредингера для цієї області

$$\frac{d^2\Phi^>(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\Phi^>(r)}{dr} - \left[\chi^2 - \frac{2\chi\lambda}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \Phi^>(r) = 0, \quad (6)$$

де введено такі величини:

$$\chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}, \quad \lambda = \frac{m\alpha}{\chi\hbar^2}.$$

Розв'язок шукатимемо у вигляді

$$\Phi^>(r) = (\chi r)^l e^{-\chi r} u(r).$$

Підставляючи $\Phi^>(r)$ у рівняння, отримаємо для невідомої функції $u(r)$ таке рівняння:

$$ru''(r) + [2(l+1) - 2\chi r]u'(r) - 2\chi(l+1-\lambda)u(r) = 0.$$

Увівши нову змінну $x = 2\chi r$, знайдемо рівняння Куммера для функції $u(r)$ і розв'язок (7) представимо так [7]:

$$\Phi^>(r) = B_l (\chi r)^l e^{-\chi r} U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi r), \quad (7)$$

де B_l — константа, а функція пов'язана з виродженою гіпергеометричною функцією $U(a, b, z) = z^{1-b} M(1+a-b, 2-b, z)$.

Отже, остаточно отримали такі хвильові функції в кожній області:

$$\Phi^<(r) = A_l \left(\frac{r}{r_0} \right)^l e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r_0}\right)^2} \times M \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right), \quad (8)$$

$$\Phi^>(r) = B_l (\chi r)^l e^{-\chi r} U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi r). \quad (9)$$

Тепер із системи (3) знайдемо співвідношення для коефіцієнтів

$$B_l = \frac{A_l e^{\chi R} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2} M \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right)}{(\chi r_0)^l U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)} \quad (10)$$

та знайдемо трансцендентне рівняння для визначення енергетичних рівнів:

$$\frac{2R}{r_0^2} \frac{M' \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right)}{M \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right)} - 2\chi \frac{U'(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)}{U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)} + \chi - \frac{R}{r_0^2} = 0. \quad (11)$$

Хвильову радіальну функцію системи можна записати за допомогою функції Гевісайда так:

$$\Phi(r) = C \left\{ \Theta(R-r) \left(\frac{r}{r_0} \right)^l e^{-\frac{1}{2} \left\{ \frac{r^2-R^2}{r_0^2} \right\}} \frac{M \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right)}{\left(\frac{R}{r_0} \right)^l M \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right)} \right\} + C \left\{ \Theta(r-R) e^{-\chi(r-R)} \left(\frac{r}{R} \right)^l \frac{U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi r)}{U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)} \right\}, \quad (12)$$

де сталу C знаходимо з умови нормування

$$\int_0^{+\infty} dr r^2 \Phi^2(r) = 1. \quad (13)$$

III. РІВНЯННЯ ДЛЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ ЕЛЕКТРОНА І ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ СИСТЕМИ

Розглянемо випадок, коли потенціал (1) збігається зі скалярним потенціалом зарядженої сфери при $Z = 1$. Використаймо одиниці вимірювання енергії в рідбергах і віддалі в одиницях радіуса Бора, тобто

$$|E| = \frac{1}{2} \xi^2 E_a, \quad R = \eta a_0, \quad (14)$$

де $E_a = \frac{me^4}{\hbar^2} = 2Ry = 27.21 \text{ eV}$ і $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.053 \text{ нм}$. Оскільки η змінюється в межах $0 \leq \eta < +\infty$ і $|E| \leq V_0$, $V_0 = \frac{3Ze^2}{2R}$, умова для ξ :

$$0 \leq \xi \leq \sqrt{\frac{3}{\eta}}.$$

Підставмо ці позначення в дисперсійне співвідношення (11), тоді

$$\frac{2}{\xi \sqrt{\eta}} \frac{M' \left(\frac{1}{4}\xi^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \sqrt{\eta} \right), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta} \right)}{M \left(\frac{1}{4}\xi^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \sqrt{\eta} \right), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta} \right)} - 2 \frac{U'(l+1-\xi^{-1}, 2l+2, 2\xi\eta)}{U(l+1-\xi^{-1}, 2l+2, 2\xi\eta)} + 1 - \frac{1}{\xi \sqrt{\eta}} = 0. \quad (15)$$

Використаймо відомі правила диференціювання для гіпергеометричних функцій $M(a, b, x)$ $U(a, b, x)$ [9]:

$$\frac{U'(a, b, x)}{U(a, b, x)} = 1 - \frac{U(a, b+1, x)}{u(a, b, x)};$$

$$\frac{M'(a, b, x)}{M(a, b, x)} = 1 + \frac{a-b}{b} \frac{M(a, b+1, x)}{M(a, b, x)}.$$

Тоді рівняння для визначення енергетичних рівнів матиме вигляд

$$\frac{2}{\xi \sqrt{\eta}} \left(1 - \frac{\frac{1}{4}\xi^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \sqrt{\eta} \right)}{l + \frac{3}{2}} \right) \frac{M \left(\frac{1}{4}\xi^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \sqrt{\eta} \right), l + \frac{5}{2}, \sqrt{\eta} \right)}{M \left(\frac{1}{4}\xi^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \sqrt{\eta} \right), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta} \right)} - 2 \frac{U(l+1-\xi^{-1}, 2l+3, 2\xi\eta)}{U(l+1-\xi^{-1}, 2l+2, 2\xi\eta)} + 1 - \frac{1}{\xi \sqrt{\eta}} = 0. \quad (16)$$

Цікаво зауважити, що в цій системі немає випадкового виродження енергетичних рівнів, що суттєво відрізняє її від "чистого" кулонівського потенціалу (атом водню). Параметр ξ є функцією радіуса η нанокілі [7]. Цей параметр також залежить від квантового числа l і радіального квантового числа $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$:

$$\xi = \xi_{l, n_r}(\eta). \quad (17)$$

Повна радіальна хвильова функція системи (12):

$$\Phi_{l,n_r}(\rho) = a_0^{-3/2} C_{l,n_r} \begin{cases} \left(\frac{\rho}{\eta}\right)^l e^{-\frac{\sqrt{\eta}}{2}((\frac{\rho}{\eta})^2-1)} \frac{M\left(\frac{1}{4}\xi_{l,n_r}^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}\right), l + \frac{3}{2}, \frac{\rho^2}{\sqrt{\eta^3}}\right)}{M\left(\frac{1}{4}\xi_{l,n_r}^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}\right), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta}\right)}, & \rho < \eta \\ \left(\frac{\rho}{\eta}\right)^l \frac{e^{-\xi_{l,n_r}\rho} U(l+1 - \xi_{l,n_r}^{-1}, 2l+1, 2\xi_{l,n_r}\rho)}{e^{-\eta\xi_{l,n_r}} U(l+1 - \xi_{l,n_r}^{-1}, 2l+1, 2\xi_{l,n_r}\eta)}, & \rho > \eta \end{cases} \quad (18)$$

що відповідає значенням енергії

$$E_{l,n_r} = -\xi_{l,n_r}^2 R\gamma, \quad (19)$$

тут уведено позначення $\rho = r/a_0$ в одиницях радіуса Бора.

Константу C_{l,n_r} визначаємо з умови нормування:

$$C_{l,n_r}^{-2} = \int_0^\eta d\rho \rho^2 \{\Phi^<(\rho)\}^2 + \int_\eta^{+\infty} d\rho \rho^2 \{\Phi^>(\rho)\}^2.$$

IV. ГРАНИЧНІ ВИПАДКИ

Обговоримо обидва граничні випадки і покажемо узгодження з відомими результатами: при $\eta \rightarrow 0$ ($R \rightarrow 0$) отримаємо розв'язок водневої задачі, при $\eta \rightarrow \infty$ ($R \rightarrow \infty$) — просторовий гармонічний осцилятор.

1) $\eta \rightarrow 0$ ($R \rightarrow 0$). Обчислимо закон дисперсії (16) та хвильову функцію (18) системи в границі $\eta \rightarrow 0$, що відповідає кулонівському потенціалу в (1) при $R = 0$.

Використаймо відомі вирази для гіпергеометричних функцій $M(a, b, z)$ та $U(a, b, z)$ при $z \rightarrow 0$ і $b > 2$ [9]:

$$\begin{aligned} M(a, b, z) &\rightarrow 1, \\ U(a, b, z) &\rightarrow \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b}. \end{aligned} \quad (20)$$

Тоді дисперсійне співвідношення (16) виконується лише за умови

$$\frac{1}{\Gamma(l+1 - \xi^{-1})} = 0. \quad (21)$$

Беручи до уваги той факт, що полюси Γ -функції існують тільки для від'ємних цілих значень [9], ми отримаємо $l+1 - \xi^{-1} = -n_r$ ($n_r = 0, 1, 2, \dots$) з рівняння (21), звідки розв'язок (17) при $\eta \rightarrow 0$ знайдемо у вигляді

$$\xi_{l,n_r}(0) = \frac{1}{n_r + l + 1}. \quad (22)$$

Підставивши це співвідношення в рівняння (19), ми остаточно отримаємо спектр водневого атома

$$E_{l,n_r} = -\frac{R\gamma}{(n_r + l + 1)^2}. \quad (23)$$

Ураховуючи (22), знайдемо границю $\eta \rightarrow 0$ у виразі для хвильової функції системи (18) і отримаємо координатно-залежну частину хвильової функції

$$\Phi(\rho) \sim \rho^l e^{-\xi\rho} u(-n_r, 2l+2, 2\xi\rho).$$

Використавши вираз для функції $U(-n, \alpha+1, x) = (-1)^n n! L_n^{(\alpha)}(x)$ в термінах поліномів Лагґера для $n = 0, 1, 2, \dots$, отримаємо радіальну хвильову функцію атома водню [14]. Зауважимо, що при заміні $\xi \rightarrow Z\xi$ і $\eta \rightarrow Z^{-1}\eta$ можна узагальнити ці результати для $Z \neq 1$.

2) $\eta \rightarrow \infty$ ($R \rightarrow \infty$). Розгляньмо інший граничний випадок. Асимптотичні вирази для гіпергеометричних функцій при $z \rightarrow +\infty$, $b > 2$ [9]

$$\begin{aligned} M(a, b, z) &\rightarrow \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b}, \\ U(a, b, z) &\rightarrow z^{-a}. \end{aligned} \quad (24)$$

Тоді з дисперсійного співвідношення (16) отримаємо

$$\frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}\right)\right)} = 0,$$

звідки $\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}\right) = -n_r$ ($n_r = 0, 1, 2, \dots$).

Остаточно спектр просторового гармонійного осцилятора такий:

$$\begin{aligned} E_{l,n_r} &= \hbar\omega_0 \left(2n_r + l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0}\right)^2 \right) \\ &= \hbar\omega_0 \left(N + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \frac{Ze^2}{R} \right). \end{aligned}$$

У граничному випадку $\eta \rightarrow +\infty$, із урахуванням вигляду енергетичного спектра отримаємо координатно-залежну частину хвильової функції

$$\Phi(\rho) \sim \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} M\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, \rho^2\right),$$

де $\rho = \frac{r}{r_0}$.

Узявши до уваги відомий зв'язок між гіпергеометричною функцією та поліномами Лагґера [9]:

$$L_n^\alpha(x) = \frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!\Gamma(\alpha+1)} M(-n, \alpha+1, x),$$

де

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \left(\frac{d}{dx} \right)^n x^{n+\alpha} e^{-x}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

отримаємо радіальну функцію просторового гармонійного осцилятора [14]

$$\Phi(\rho) \sim \frac{\Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})} \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\rho^2).$$

V. ЧИСЕЛЬНІ РОЗРАХУНКИ

У цьому розділі проаналізуємо електронні енергетичні рівні та електронну функцію розподілу нашої моделі для різних значень радіуса нанокіулі. Значення енергії $\xi_{l,n_r}(\eta)$ отримано з розв'язку рівняння (16). Енергію електрона знайдено з (19), значення енергії зв'язку є близько $10^{-2} R_y$.

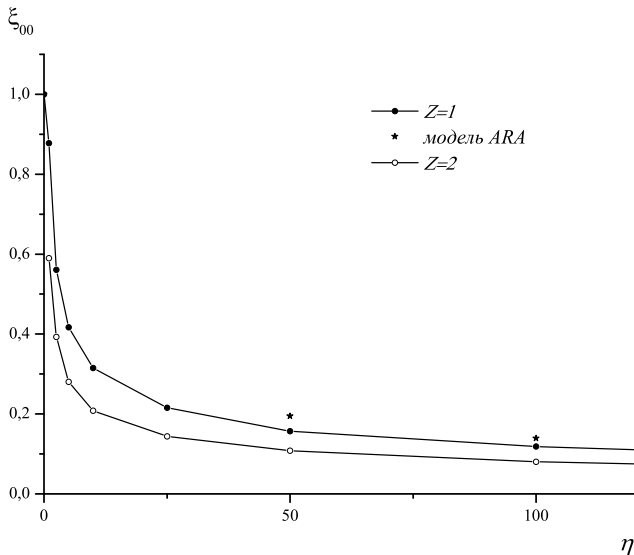


Рис. 1. Залежність енергії основного стану $\xi_{0,0}(\eta)$ від радіуса нанокіулі η . Для порівняння показано * — результати, отримані в моделі ARA [7].

На рис. 1 показано залежність енергії основного стану $\xi_{0,0}(\eta)$ від радіуса нанокіулі η . Наприклад, $\xi_{0,0}(0) = 1$ для атома водню ($\eta = 0$) і $\xi_{0,0}(\eta)$ при $\eta = 50$ ($R = 2.65 \text{ nm}$), $\eta = 100$ ($R = 5.3 \text{ nm}$), $\eta = 150$ ($R = 7.95 \text{ nm}$), $\eta = 200$ ($R = 10.6 \text{ nm}$) для нанокіулі відповідного радіуса.

Узагальнивши отримані результати для $Z \neq 1$, бачимо з рис. 2, що вплив розмірів і форми нанокіулі сильно позначається на положенні енергетичного рівня зі зростанням Z . Так, для $Z = 1, \eta = 1, \xi = 0.8775$, а для $Z = 2, \eta = 1, \xi = 0.5899$. Уже при $Z = 3$ енергія s -рівня вдвічі менша, ніж для точкового атома. Для $\eta = 50$

$$\begin{aligned} \xi &= 0.16056, Z = 1; & \xi &= 0.10791, Z = 2; \\ \xi &= 0.08516, Z = 3. \end{aligned}$$

Обраний потенціал має ту перевагу, що дає змогу здійснювати неперервний перехід від його кулонівської частини до гармонійної, змінюючи лише величину радіуса зарядженої кіулі η . На рис. 2 показано зміну одноелектронного енергетичного спектра зі зміною радіуса.

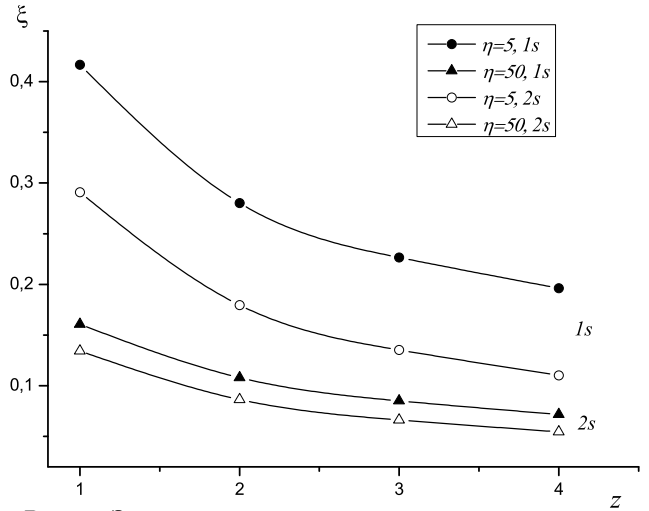


Рис. 2. Зміна s -симетричних станів зі зміною заряду нанокіулі Z для $\eta=5, \eta=50$.

Для області значень $0 < \eta < 1$ енергетичний спектр є водневоподібним. Зі зростанням радіуса енергетичні рівні зміщуються. Це зміщення є найсуттєвішим для станів s -симетрії. Бачимо, що зі збільшенням радіуса енергетичні рівні стають еквідистантними. Щобільше перший збуджений стан є p -симетрії, другий збуджений стан відповідає виродженим $2s$ і $3d$ станам. Отже, спектр водневої задачі переходить у спектр гармонійного осцилятора зі зростанням радіуса нанокіулі.

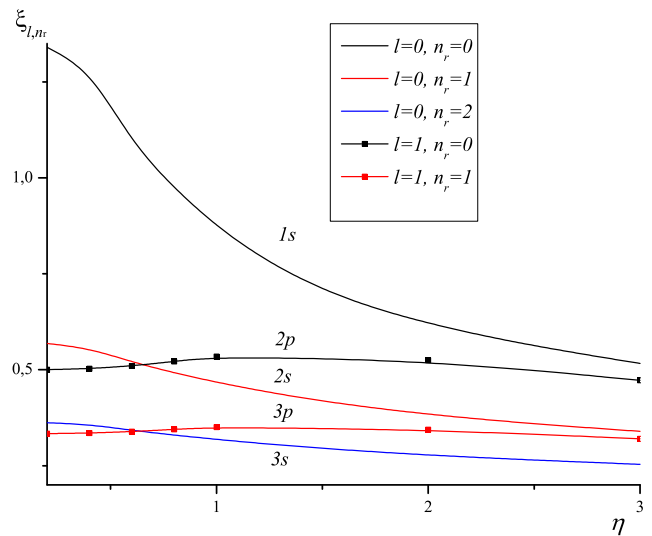


Рис. 3. Залежність енергії $\xi_{l,n_r}(\eta)$ від радіуса нанокіулі η .

Наші результати узгоджуються з даними праці [15], у якій одноелектронний енергетичний спектр отримано з розв'язку рівняння Шредингера методом Гартрі-Фока [16] для водневоподібного спектра йона Ne^{9+} .

У статті [15] також показано, що зі збільшенням радіуса нанокілі ймовірність знайти частинку поза її межами зменшується (це становить 28% для $\eta = 0,5$ і 12% для $\eta = 1$ відповідно). Це означає, що для досить великих радіусів нанокілі електрон відчуває тільки томсонівський осциляторний потенціал, тобто лише параболічну частину потенціалу (1). Цей ефект справджується і для хвильових функцій збуджених станів.

Функція $\xi_{l,n_r}(\eta)$ є монотонно спадною функцією η . Можна зауважити з рис. 3, що енергетичні рівні при великих значеннях η є строго впорядкованими для кожного фіксованого радіуса нанокілі. А саме,

$$E_{0,n_r} < E_{1,n_r} < E_{2,n_r} < \dots$$

$$\dots < E_{0,n_r+1} < E_{1,n_r+1} < E_{2,n_r+1} < \dots$$

Отже, тут немає випадкового виродження, яке наявне у випадку чистого кулонівського потенціалу (точковий атом).

Із прикладного погляду важливою є енергія $\Delta E(\eta)$ — різниця між першим збудженим і основним енергетичними рівнями:

$$\Delta E(50) = 3,67 \cdot 10^{-4} \text{Ry},$$

$$\Delta E(100) = 1,06 \cdot 10^{-4} \text{Ry},$$

$$\Delta E(150) = 0,42 \cdot 10^{-4} \text{Ry},$$

$$\Delta E(200) = 0,29 \cdot 10^{-4} \text{Ry}.$$

Отже, частота переходу, що відповідає збудженим станам, є порядку ТГц у цілому діапазоні зміни радіуса нанокілі (2.65 nm–10.6 nm). Оскільки тривалість збудженого рівня пропорційна $(\Delta\omega)^3$, можна зробити висновок, що перший збуджений стан у нашій моделі також має тривалий час життя за аналогією з рідбергівським атомом [7]. Для дослідження збуджених станів побудуємо радіальну густину розподілу ймовірності положення електрона в стаціонарному стані (n, l)

$$D_{n,l}(\rho) = \rho^2 \Phi_{n,l}^2(\rho).$$

На рис. 4 показано радіальний розподіл електронної густини ймовірності для нанокілі з радіусом $R = 10.6 \text{ nm}$ ($\eta = 200$) і $l = 0$ для $n_r = 0, 1, 2$. Як видно з цих графіків, електронна хмара ($\rho \approx 400$) є в сотні разів більшою, ніж для атома водню ($\rho \approx 3$). Оскільки електронна хмара пов'язана з дипольними матричними елементами, як показує теорія атома Рідберга [8], то збільшення розподілу електронів спричиняє збільшення дипольних матричних елементів і, відповідно, підвищує чутливість системи до зовнішніх збурень.

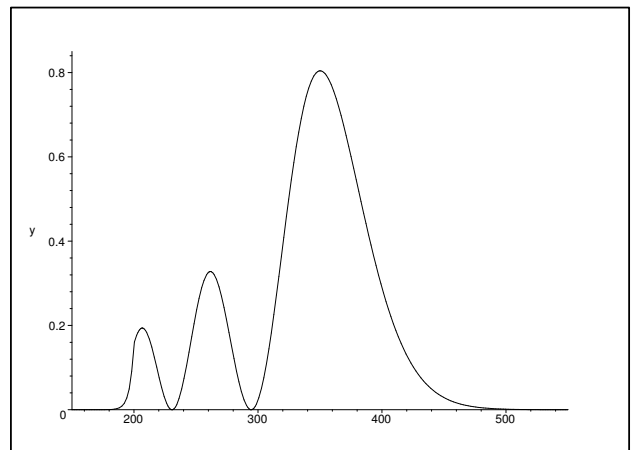
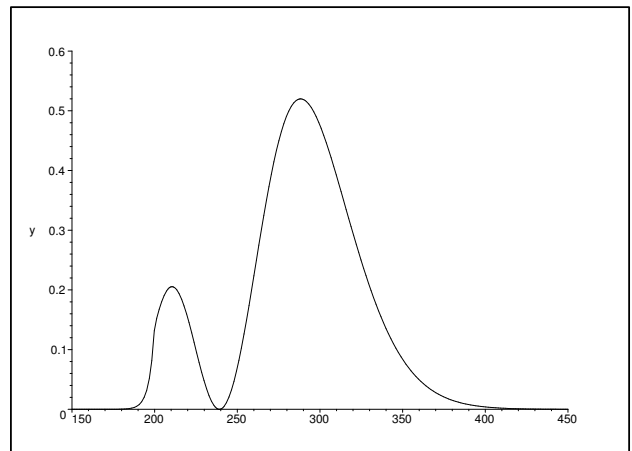
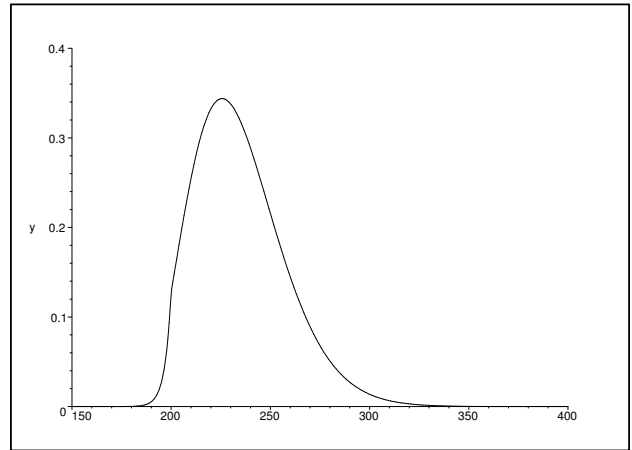


Рис. 4. Радіальний розподіл електронної густини $D_{n,l}(\rho)$, $n_r = 0, 1, 2$.

ВИСНОВКИ

На завершення зауважимо, що запропонована модель дає змогу розв'язати задачу про знаходження спектра та хвильових функцій електрона у сферичній квантовій точці (СКТ). Отримане трансцендентне рівняння для спектра залежить від розмірів та форми нанокілі. Показано, що зі збільшенням її радіуса розміри електронної хмари збільшуються, тоді як енер-

гія основного та збуджених станів зменшується. Також показано, що вплив розмірів та форми квантової точки особливо сильно позначається на розташуванні енергетичних рівнів при зростанні її заряду Z .

У цій моделі не враховано різниці ефективних мас електрона в області квантової точки та навколишнього середовища, а також різниці діелектричних проникливостей різних середовищ гетеросистеми. Ці величини є функціями віддалі до центра квантової точки:

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r < R, \\ m_1, & r > R \end{cases}, \quad \varepsilon(r) = \begin{cases} \varepsilon_0, & r < R, \\ \varepsilon_1, & r > R. \end{cases}$$

У роботі [17] розглянуто ці ефекти для СКТ GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As, результати показують, що ефектом різних ефективних мас можна знехтувати при $R > a_D$, $a_D = m_1/m_0 \varepsilon_{AB}$, тобто в режимі слабого конфайнменту, що зумовлено малим проникненням електронів в область бар'єра. У роботі [18] показано

добре узгодження з експериментальними даними для малих КТ CdS, уміщених у силікатне скло.

Урахування зміни діелектричної сталої на границі КТ приводить до виникнення поляризації [3]. У випадку Si/SiO₂ наноструктури нанокристал із більшою діелектричною сталою (Si) вводиться в діелектричне середовище (SiO₂) з меншою діелектричною сталою. Тоді внаслідок поляризації електрони відштовхуються від границі КТ і зміщуються до центра КТ, що спричиняє більшу локалізацію електронів усередині КТ. Вивчено поляризаційні ефекти для сферичних гетероструктур Si/SiO₂ та β -HgS/CdS у роботі [19], де показано, що врахування поляризації збільшує ефективну заборонену зону. Якщо діелектричні константи обох матеріалів тільки незначно відрізняються між собою, як у GaAs/Al_xGa_{1-x}As наноструктури з малим умістом Al, поляризаційні ефекти є незначними і ними можна знехтувати.

-
- [1] S. M. Reinmann, M. Manninen, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
 [2] S. Tarucha, *Japan Nanonet Bull.* **13**, 4 (2004).
 [3] D. Babić, R. Tsu, R. F. Greene, *Phys. Rev. B* **45**, 14150 (1992).
 E. Räsänen, H. Saarikovski *et al.* *Phys. Rev. B* **67**, 235307 (2003).
 [4] O. Steffens, *Europhys. Lett.* **42**, 529 (1998).
 [5] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, *Phys. Rev. B* **59**, 13036 (1999).
 [6] S. K. Gray, B. G. Sumpter, *Chem. Phys. Lett.* **333**, 308 (2001); D. Stojanović, R. Kostić, *Acta Phys. Polon. A* **120**, 234 (2011).
 [7] S. Joe Yong, V. E. Mkrtchian, S. H. Lee, *Phys. Lett. A* **373**, 976(2009).
 [8] T. F. Gallagher, *Rydberg atoms* (Cambridge University Press, 1994).
 [9] М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям* (Наука, Москва, 1979).
 [10] Д. Д. Іваненко, Г. Е. Пустовалов, *Усп. физ. наук* **61**, 27 (1957).
 [11] З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике, Т. 1* (Мир, Москва, 1974).
 [12] В. А. Lukiyanets, *Semicond. Phys.* **10**, 13 (2007).
 [13] М. В. Ткач, Ю. А. Сеті, *Физ. техн. полупроводников* **43**(3), 357 (2009).
 [14] Б. А. Лукіянець, Г. В. Понеділок, Ю. К. Рудавський, *Основи квантової фізики* (Вид-во Нац. ун-ту "Львівська політехніка", Львів, 2009).
 [15] B. Szafran *et al.*, *Physica E* **18**, 523 (2003).
 [16] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, *Phys. Rev. B* **64**, 195303 (2001).
 [17] B. Szafran, J. Adamowski, B. Stebe, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 7575 (1998).
 [18] М. В. Ткач, В. А. Головацький, А. М. Березовський, *Фіз. хім. тверд. тіла* **4**, 213 (2003).
 [19] В. І. Бойчук *та ін.*, *Журн. фіз. досл.* **10**, 220 (2006).

ONE-ELECTRON STATES IN THE OSCILLATOR-COULOMB MODEL OF THE QUANTUM DOT

G. V. Ponedilok, M. I. Klapchuk
*National University "Lvivska Politehnika",
 Institute of Applied Mathematics and Fundamental Sciences,
 12, S. Bandery St., Lviv, UA-79013, Ukraine*

One-electron states of the quantum dot modelled by a spherically symmetric oscillator-Coulomb potential are studied. The proposed model generalizes the known parabolic model of the quantum dot. The transcendental equation for the electron spectrum and expressions for the wave functions are obtained. The dependence of the one-electron spectrum on the quantum dot effective size and other parameters of the model potential are found. These parameters can serve as control parameters to optimize the energy structure of a spherical quantum dot in order to obtain real structures with predetermined physical and chemical properties. The conditions of applicability of the model to describe electronic properties of metallic and semiconducting quantum dots are studied. The obtained results are compared with other models of the quantum dot — spherical, rectangular and parabolic.